

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Método de Diferenças Finitas Generalizadas Aplicado à Equação de Biotransferência de Calor¹

Jan Pierre Agenciano da Silva Rocha²

Departamento de Ciência da Computação, Universidade Federal de São João del Rei

Michelli Marlane Silva Loureiro³

Departamento de Ciência da Computação, Universidade Federal de São João del Rei

Felipe dos Santos Loureiro⁴

Departamento de Ciências Térmicas e dos Fluidos, Universidade Federal de São João del Rei

Resumo. O método de diferenças finitas generalizadas (MDFG) é empregado para a solução numérica de um problema de biotransferência de calor oriunda da presença de um tumor em um tecido saudável. O MDFG pode ser classificado como um método de discretização espacial sem malha, possuindo como principal vantagem a possibilidade do uso de *grids* irregulares diretamente no domínio físico. Sendo assim, uma discussão é realizada em torno do tipo de suporte compacto, número de nós do suporte e topologia de tais nós bem como a influência de tais parâmetros na solução. A efetividade e eficácia do MDFG é demonstrada comparando-se os resultados numéricos com os obtidos pelo método de diferenças finitas clássicas tendo como referência a solução numérica obtida pelo Método dos Elementos Finitos (MEF).

Palavras-chave. Diferenças Finitas, *Grid* Irregular, Biotransferência de calor, Tumor

1 Introdução

Um dos métodos mais utilizados para solução de equações diferenciais é o das diferenças finitas clássicas (MDFC). Este que é baseado na discretização do domínio e aproximação das derivadas em cada ponto do *grid* através da série de Taylor. Devido a fácil e rápida implementação computacional, incluindo a sua versão em computação paralela, o MDFC vem sendo aplicado com sucesso em problemas de biotransferência de calor [9]. Entretanto, o MDFC, em sua implementação usual, exige que os *grids* sejam uniformes nas respectivas direções, o que é uma grande desvantagem para determinados tipos de problemas com geometria irregular. Tal desvantagem pode ser contornada, em partes, através da utilização de coordenadas generalizadas e técnicas multiblocos, mapeando a geometria irregular no domínio físico para outra regular no domínio transformado [1].

¹versão 1.2.

²jan.fis@outlook.com

³michelli.loureiro@ufsj.edu.br

⁴felipe.loureiro@ufsj.edu.br

O trabalho tem como objetivo estudar uma aplicação da versão generalizada das diferenças finitas (MDFG) em um problema de biotransferência de calor em que um tumor encontra-se presente em tecido saudável. Esta versão não possui a limitação de *grids* computacionais uniformes no domínio físico, podendo assim aumentar a precisão numérica em certos tipos de geometria, além de representá-la melhor, como ocorre, por exemplo, quando um tumor circular é considerado (caso estudado neste trabalho). De fato, o MDFG vem sendo desenvolvido e aplicado em inúmeros problemas de diferentes áreas com relativo sucesso [2, 3, 8].

2 Modelo e Solução Numérica

2.1 Biotransferência de Calor

Sejam Ω_s e Ω_t regiões definidas em \mathbb{R}^2 ocupadas, respectivamente, por um tecido saudável e um tumor tal que $\Omega = \Omega_s \cup \Omega_t$ e $\Omega_s \cap \Omega_t = \emptyset$, o modelo matemático de biotransferência de calor proposto por Pennes, em regime permanente, é dada pela seguinte E.D.P. [7, 9]:

$$k\nabla^2 T + \omega_b \rho_b c_b (T_a - T) + Q = 0, \mathbf{x} \in \Omega \quad (1)$$

onde k , ρ_b e c_b são propriedades termofísicas sendo o subscrito b denotando sangue, Q denota a geração de energia oriunda do metabolismo celular e T_a a temperatura arterial. Além disso, ω_b representa a perfusão sanguínea; portanto, o segundo termo da equação (1) modela a troca de calor entre o fluxo sanguíneo e o tecido que o circunda, desprezando o efeito direcional do fluxo sanguíneo.

2.2 Diferenças Finitas Generalizadas

O MDFG se baseia na expansão em série de Taylor em \mathbb{R}^2 da função temperatura em torno de um dado ponto (x_p, y_p) . Desta forma, seja $T(x, y)$ uma função suficientemente diferenciável em um domínio contendo (x_p, y_p) , a expansão da função até a segunda ordem incluindo o erro de truncamento é dada por [2, 3, 8]:

$$T(x, y) = T(x_p, y_p) + \Delta x \frac{\partial T(x_p, y_p)}{\partial x} + \Delta y \frac{\partial T(x_p, y_p)}{\partial y} + \frac{\Delta x^2}{2} \frac{\partial^2 T(x_p, y_p)}{\partial x^2} + \frac{\Delta y^2}{2} \frac{\partial^2 T(x_p, y_p)}{\partial y^2} + \Delta x \Delta y \frac{\partial^2 T(x_p, y_p)}{\partial x \partial y} + O(\Delta^3) \quad (2)$$

onde $\Delta x = x - x_p$, $\Delta y = y - y_p$ e $\Delta = \sqrt{\Delta x^2 + \Delta y^2}$.

Considere um suporte compacto qualquer contendo um total de $n \in \mathbb{Z}^+$ nós (pontos) como mostrado na Figura 1, e seja $T_{i,i} \approx T(x_i, y_i)$ uma solução aproximada nos nós do suporte. Aplicando-se a equação (2) sem o termo do erro de truncamento a todos os nós de tal suporte com a condição $n \geq 5$, o seguinte sistema linear de equações sobredeterminado é encontrado:

$$\mathbf{A} \mathbf{d}_T = \mathbf{f} \quad (3)$$

onde

$$\begin{aligned}
 \mathbf{A} &= \begin{bmatrix} \Delta x_1 & \Delta y_1 & \Delta x_1^2/2 & \Delta y_1^2/2 & \Delta x_1 \Delta y_1 \\ \Delta x_2 & \Delta y_2 & \Delta x_2^2/2 & \Delta y_2^2/2 & \Delta x_2 \Delta y_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Delta x_i & \Delta y_i & \Delta x_i^2/2 & \Delta y_i^2/2 & \Delta x_i \Delta y_i \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Delta x_n & \Delta y_n & \Delta x_n^2/2 & \Delta y_n^2/2 & \Delta x_n \Delta y_n \end{bmatrix} \\
 \mathbf{f} &= [T_1 - T_p \quad T_2 - T_p \quad \dots \quad T_n - T_p]^T \\
 \mathbf{d}_T &= \left[\frac{\partial T_{p,p}}{\partial x} \quad \frac{\partial T_{p,p}}{\partial y} \quad \frac{\partial^2 T_{p,p}}{\partial x^2} \quad \frac{\partial^2 T_{p,p}}{\partial y^2} \quad \frac{\partial^2 T_{p,p}}{\partial x \partial y} \right]^T
 \end{aligned} \tag{4}$$

Portanto para encontrar uma relação das derivadas parciais contidas no vetor \mathbf{d}_T em função dos valores nodais de temperatura aplica-se aqui o método dos mínimos quadrados ponderado pela matriz diagonal \mathbf{W} . Assim o seguinte funcional deve ser minimizado:

$$\min \| \mathbf{W} (\mathbf{A} \mathbf{d}_T - \mathbf{f}) \|^2 \tag{5}$$

onde $W_{ii} = 1/(\Delta x_i^2 + \Delta y_i^2)$, $i = 1, \dots, n$ são as ponderações utilizadas.

A minimização é, então, efetuada pelo método direto (equações “normais”) dado por $\mathbf{A}^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} \mathbf{A} \mathbf{d}_T = \mathbf{A}^T \mathbf{W}^T \mathbf{W} \mathbf{f}$ que se mostrou bastante eficaz no sentido que nenhum mal-condicionamento foi encontrado para o suporte compacto adotado, evitando, assim, a utilização de métodos mais robustos como SVD e fatoração QR. Uma vez definido as aproximações para as derivadas parciais (principalmente as derivadas de segunda ordem), precede-se com a discretização da equação (1). Portanto, o domínio Ω é então discretizado em $N \in \mathbb{Z}^+$ pontos nodais, sendo a equação (1) aplicada nos pontos de colocação (x_p, y_p) , $p = 1, \dots, N$ que após inserido as aproximações para o Laplaciano e as condições de contorno apropriadas discretizadas discutidas na próxima seção, um sistema linear da forma $\mathbf{K} \mathbf{T} = \mathbf{F}$ é obtido. Com relação as propriedades termofísicas, apenas a perfusão sanguínea varia espacialmente sendo esta avaliada diretamente nos pontos do grid no MDFG. Para uma possível variação espacial na condutividade térmica e sua implementação junto ao MDFG consultar [4].

A escolha da geometria do suporte compacto é arbitrária podendo ser retangular, circular, etc. tal que todos os pontos inclusos em tal suporte podem ser selecionados. Uma outra estratégia consiste em selecionar os nós do suporte tomando como base a distância euclidiana em relação ao nó (ponto) central (referência) (x_p, y_p) [6]. Tal estratégia é a mais simples de ser implementada; porém, apresenta uma baixa precisão para *grids* com densidade irregular de nós [2]. Pensando nisso foi escolhido o critério proposto por [6] que consiste em dividir o espaço de busca em quadrantes (Figura 1 - região em marrom) e selecionar os 2 pontos mais próximos do ponto central em cada quadrante (nós em vermelho), o que implica em uma melhor precisão [2]. Também foi escolhido o critério de pontos mínimos, selecionando ao menos 1 nó por quadrante. Como exemplo, para $n = 8$ pontos de suporte são selecionados os dois mais próximos por quadrante, enquanto que para $n = 5$ pontos é selecionado pelo menos um ponto por quadrante. Como para $n = 5$ dos quadrantes terá obrigatoriamente 2 nós e motivado por resultados imprecisos obtidos,

optou-se por testar um suporte com $n = 4$, eliminando a derivada cruzada da equação (2) (última linha e última coluna da matriz \mathbf{A}) e resultados precisos foram alcançados.

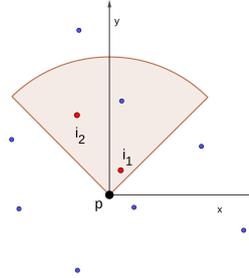


Figura 1: Quadrante do suporte compacto do p th ponto de colocação.

3 Resultados e discussões

Para o estudo e testes foi adotada uma geometria retangular para o tecido saudável [5] de domínio $\Omega_s = ([0, 0.03m[\times] - 0.04, 0.04m]) \setminus \Omega_t$ com três tipos de condições de contorno, denominadas: temperatura prescrita constante $\bar{T} = 37^\circ\text{C}$ (temperatura interna do corpo) em $x = 0.03m$, fluxo nulo prescrito $\bar{q} = 0$ (truncamento do domínio) em $y = -0.04m$ e $y = 0.04m$ e convecção dada por $\bar{q} = h(T - T_\infty)$ com $h = 10 \text{ W}/(\text{m}^2\text{C})$ e $T_\infty = 25^\circ\text{C}$ simulando a troca de calor entre a superfície da pele e o meio externo em $x = 0.0m$. O tumor contido no tecido saudável no entanto é representado por uma geometria circular dado por $\Omega_t = \{x, y \in \mathbb{R} : (x - 0.01)^2 + y^2 \leq 2.5 \times 10^{-5}\}$. As propriedades termofísicas para o problema estão presentes na Tabela 1. Observe que o tumor possui uma maior perfusão sanguínea e um maior metabolismo devido a sua maior vascularização.

Tabela 1: Propriedades termofísicas para o modelo [7].

	ρ_b [kg/m ³]	c_b [J/(kg°C)]	k [W/(m°C)]	ω_b [ml _b /(ml _t s)]	Q [W/m ³]
Tecido Saudável	1000	4000	0.5	0.0005	420
Tumor	1000	4000	0.5	0.002	4200

Para comparações entre os métodos MDFC de segunda ordem e MDFG foram escolhidos 10 *grids*, sendo 5 regulares para o MDFC e 5 irregulares para o MDFG conforme Tabela 2. Devido a geometria retangular do tecido saudável, optou-se por utilizar também a discretização das condições de contorno através do esquema clássico de nós fantasmas de segunda ordem do MDFC para o método MDFG, sendo, portanto, necessário que as bordas e os pontos adjacentes fossem igualmente espaçados, possuindo um espaçamento próximo ao *grid* regular equivalente (Figura 2). Para os pontos de colocação no interior do *grid* irregular foi seguido o critério de n pontos de suporte com um espaçamento reduzido em cerca de metade ao redor do tumor e novamente reduzido pela metade em seu interior.

Devido a ausência de uma solução analítica, a solução obtida pelo MEF [5] com uma malha fina de elementos triangulares quadráticos de 760404 nós foi adotada como referência

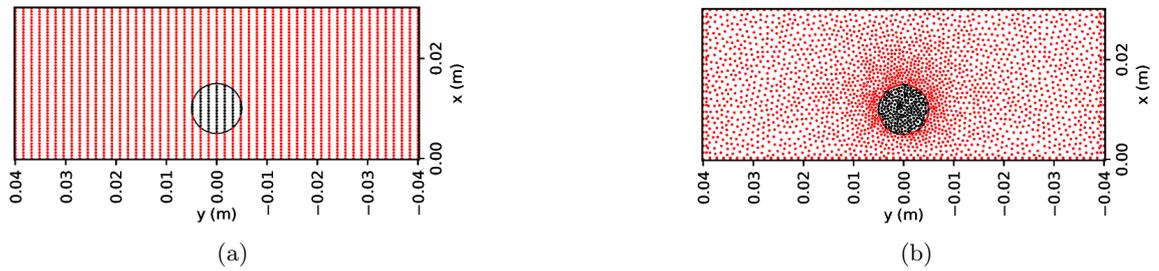


Figura 2: Comparação entre dois *grids* equivalentes: (a) *Grid* para o MDFC com 2601 nós. (b) *Grid* para o MDFG com 2583 nós.

sendo possível, assim, estimar o erro RMS da temperatura superficial da pele de cada um dos 10 *grids* (Tabela 2). A escolha de tal superfície (pele) como referência para a análise dos resultados se dá pela importância prática do conhecimento dessa distribuição de temperatura para a detecção de tumores [5, 7]. É possível observar que a escolha dos pontos de suporte para o MDFG influencia drasticamente na precisão do método dada a diferença dos erros nos mesmos *grids* com 8 e 5 pontos de suporte, sendo que para este último resultados imprecisos são observados, o que está de acordo com [2, 6, 8]. Já para 4 nós de suporte resultados precisos foram encontrados, porém, com uma menor precisão comparativamente ao MDFG-8 pontos. Além disso, pode-se mostrar que o MDFG é de segunda ordem [2, 6, 8], exceto para 4 nós de suporte em que a ordem é inferior a dois.

Tabela 2: Comparação do Erro RMS.

Método	Nós	Nós de suporte	Erro	Nós de suporte	Erro	Nós de suporte	Erro	Método	Nós	Erro
MDFG	134	4	0.0458	5	0.1136	8	0.0206	MDFC	121	0.0294
MDFG	403	4	0.0309	5	0.7004	8	0.0232	MDFC	441	0.0150
MDFG	2583	4	6.7E-3	5	0.0412	8	1.3E-3	MDFC	2601	3.3E-3
MDFG	9939	4	2.4E-3	5	0.0154	8	4.8E-4	MDFC	10201	2.8E-3
MDFG	39973	4	1.7E-3	5	0.1790	8	6.6E-5	MDFC	40401	1.2E-4

Comparando o MDFC com o MDFG-8 pontos (ambos de segunda ordem) é possível observar que o MDFG obteve um melhor desempenho em termos de precisão na maioria dos casos, o que é justificável pela melhor representação do tumor circular presente nos *grids* irregulares (Figura 3). Entretanto, nos *grids* menos refinados o MDFC conseguiu um melhor resultado, pois os nós estão melhores distribuídos ao longo do *grid* se comparado as irregulares onde os nós se concentram próximo ao tumor, possuindo assim distâncias maiores entre os pontos do grid em regiões distantes do tumor.

A principal desvantagem do MDFG com relação ao MDFC é o custo computacional relativamente mais elevado. Este, por sua vez, pode ser amenizado levando em consideração o código em paralelo e pelo fato de que o MDFG pode ser facilmente aplicado a problemas com geometrias complexas o que não acontece com o MDFC. Tendo como referência os *grids* da Figura 2, a matriz esparsa do MDFC (Figura 4(a)) possui aproximadamente 0.18% de valores não nulos, enquanto a matriz esparsa (Figura 4(b)-(c)) para o MDFG possui aproximadamente 0.22% e 0.33% de valores não nulos para 5 e 8 pontos de suporte,

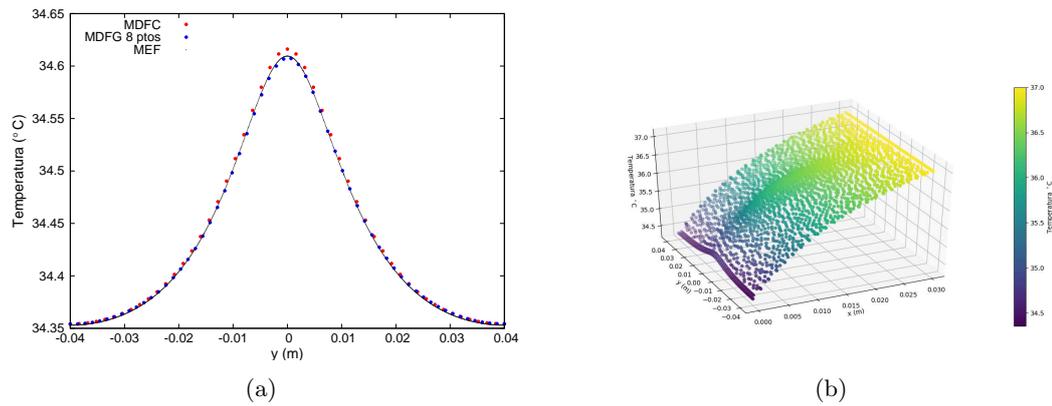


Figura 3: (a) Comparação entre os métodos com relação a temperatura superficial (pele) (b) Distribuição de temperatura no MDFG no *grid* de 2583 nós.

respectivamente, desvantagem essa que pode ser compensada pela considerável diferença entre os erros numéricos dos métodos. Cabe destacar que para 4 pontos de suporte obtêm-se a mesma esparsidade da matriz do MDFC. Para a obtenção de uma menor banda nas matrizes resultantes do MDFG, foi usado o método de permutação Reverse-Cuthill McKee.

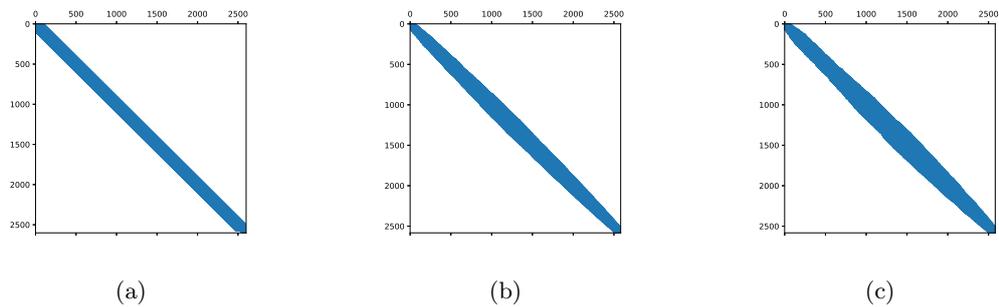


Figura 4: Matrizes esparsas para (a) MDFC com 2601 nós (b) MDFG de 2583 nós e 5 pontos de suporte e (c) MDFG de 2583 nós com 8 pontos de suporte.

4 Conclusão

No presente trabalho foi discutido a aplicação de um esquema numérico baseado no método de diferenças finitas generalizadas para a solução numérica da equação de Pennes de biotransferência de calor. O MDFG foi capaz de descrever de forma precisa a geometria circular do tumor dentro de um tecido saudável retangular. Além disso foi mostrado que resultados mais precisos foram obtidos quando comparados ao método clássico de diferenças finitas tendo como referência a solução oriunda do MEF. Foi discutido também algumas características importantes com relação a distribuição e número de pontos dentro do suporte compacto empregado para que resultados precisos fossem alcançados, concluindo-se

que $n = 8$ pontos são suficientes. Além disso, eliminado a derivada cruzada na formulação do MDFG e adotando $n = 4$ pontos de suporte, resultados precisos também foram obtidos. Embora com um erro relativamente superior ao MDFC, este mantém a mesma esparsidade do MDFC, mas com a vantagem de ser aplicado a *grids* irregulares.

Em linhas gerais, o MDFG se mostrou flexível e promissor, possuindo as seguintes características numéricas (embora nem todos tenham sido estudadas no presente trabalho): i) *grid* irregular; ii) matriz esparsa; iii) algoritmo altamente paralelizável; iv) entendimento e programação relativamente fáceis; v) flexibilidade quanto a geometria do suporte e número de nós; e vi) refinamentos locais através da inserção de novos nós de forma direta.

Agradecimentos

Suporte financeiro oferecido pela FAPEMIG, CNPq e UFSJ.

Referências

- [1] J. O. Almeida, D. C. Lobão, C. S. Stampa, and G. B. Alvarez. Multi-block Technique Applied to Navier-Stokes Equations in Two Dimensions, *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas, Londrina*, 39:115-124, 2018.
- [2] J. J. Benito, F. Ureña, and L. Gavete. Influence of several factors in the generalized finite difference method, *Appl. Math. Model.*, 25:1039-1053, 2001.
- [3] J. Chen, Y. Gu, M. Yang., W. Chen, and L. Liu. Application of the generalized finite difference method to three-dimensional transient electromagnetic problems, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 92:257-266, 2018.
- [4] J. Fang, G. F. Zhao, J. Zhao, and A. Parriaux. On the truly meshless solution of heat conduction problems in heterogeneous media, *Numer. Heat Transf.*, 55:1-13, 2009.
- [5] A. M. G. Filho, L. L. Nogueira, J. V. C. Silveira, M. M. S. Loureiro, and F. S. Loureiro. Solution of the Inverse Bioheat Transfer Problem for the Detection of Tumors by Genetic Algorithms, *Intern. Conf. Comput. Sci. Appl.*. Volume 10405, 2017.
- [6] T. Liszka, and J. Orkisz. The finite difference method at arbitrary irregular grids and its application in applied mechanics, *Comput. Struc.*, 11:83-95, 1980
- [7] P. W. Partridge, and L. C. Wrobel. An inverse geometry problem for the localisation of skin tumours by thermal analysis, *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 31: 803-811, 2007.
- [8] N. Perrone, and R. Kao. A general finite difference method for arbitrary meshes, *Comput. Struct.*. 5: 45-57, 1975
- [9] R. F. Reis, F. S. Loureiro, and M. Lobosco. 3D numerical simulations on GPUs of hyperthermia with nanoparticles by a nonlinear bioheat model, *J. Comp. App. Math.*, 295: 35-47, 2016.